

# Polimerização de Cristais Moleculares C<sub>70</sub>-cubano Utilizando Simulação por Dinâmica Molecular

Luiz Claudemir Garcia Junior (Pesquisador PIBIC) – Curso de Engenharia de Produção

Prof. Dr. Vítor Rafael Coluci (Orientador)

## INTRODUÇÃO

Este estudo tem como objetivo estudar o comportamento mecânicos dos cristais moleculares formados por espécies de fullerenos (C<sub>70</sub>) e cubano (C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>) - Figura 1 - quando submetidos à alta temperatura. A partir disto, investigar a isomerização das moléculas de Cubano e posterior polimerização entre as moléculas de C<sub>70</sub> - Figura 2.

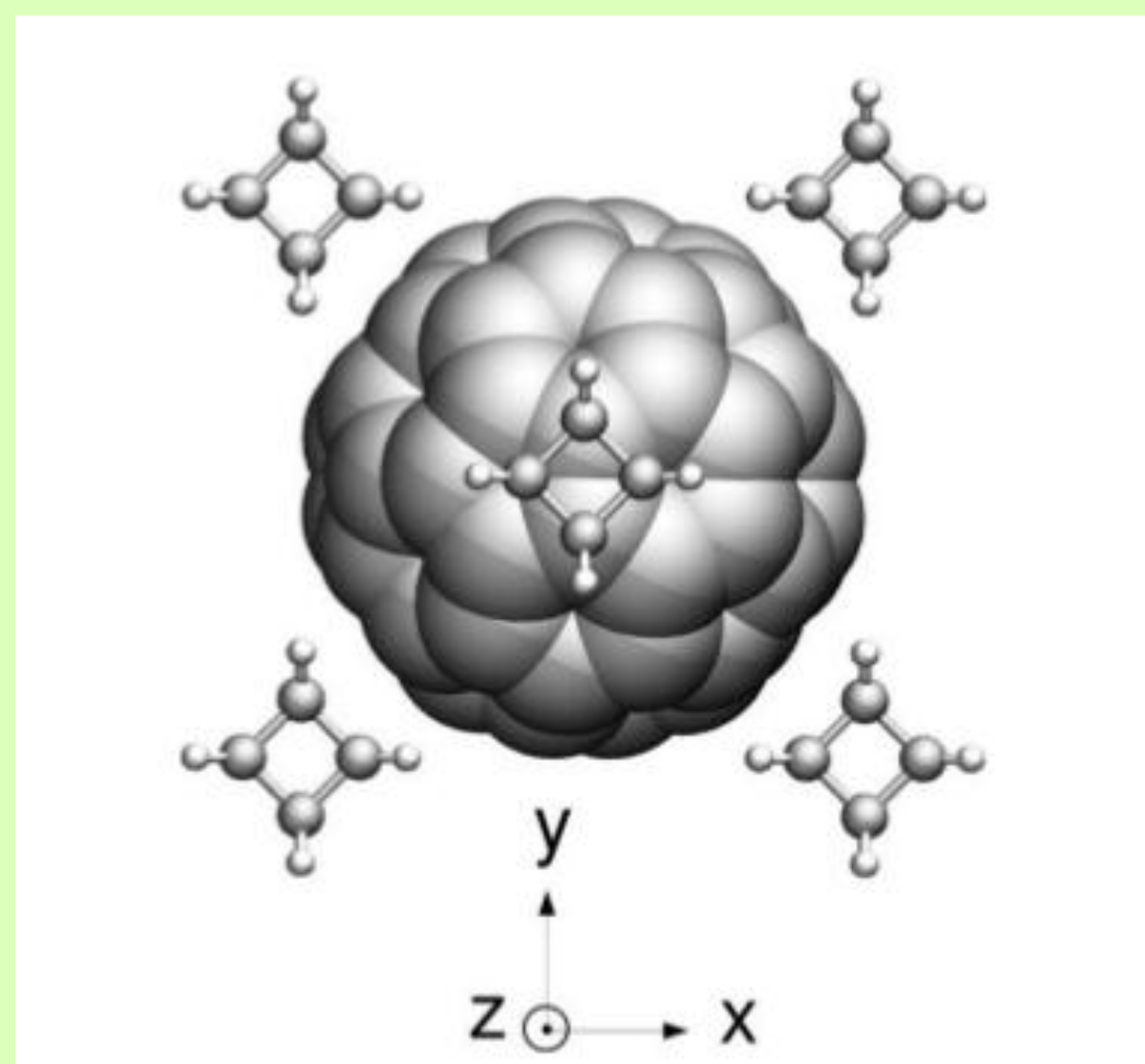


Figura 1 – Cristal C<sub>70</sub>-cubano

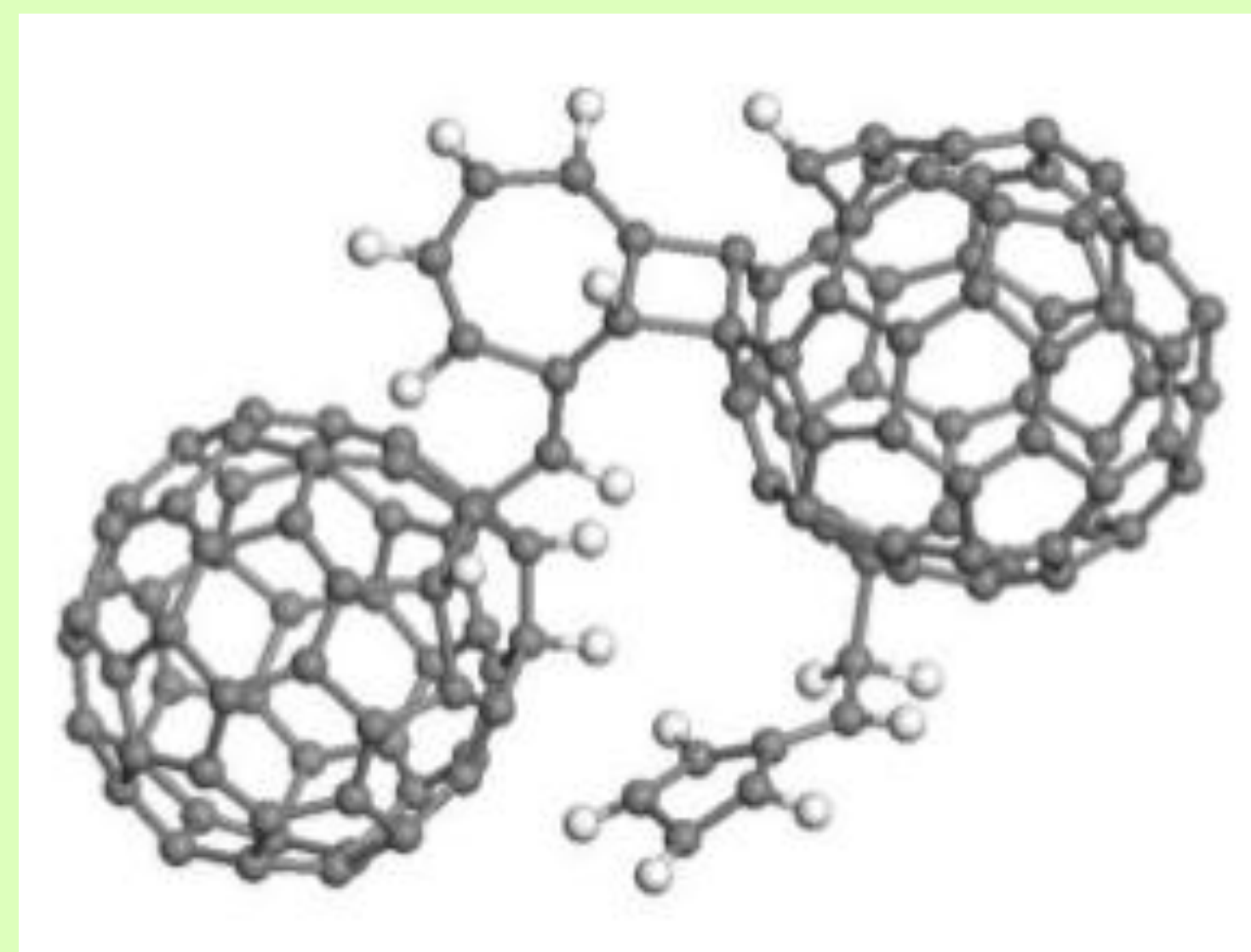


Figura 2 – Início da copolimerização

## METODOLOGIA

Através de simulação computacional, utilizando-se de clusters de processamento de alto desempenho da Faculdade de Tecnologia da Unicamp, por meio do programa TROCADERO para simulações atomísticas de larga escala, utilizou-se o método de Dinâmica Molecular para recriar as condições do sistema à altas temperaturas. O modelo utilizado foi o Tight-binding Model, que encorporea a descrição da estrutura eletrônica, sendo necessário fornecer alguns parâmetros e características das espécies de átomos presentes no estudo.



## TAMANHO DO SISTEMA

O sistema onde os átomos estão contidos não é finito. Comparando-o a uma caixa cúbica, se um dos átomos se aproximar de uma de suas extremidades, poderá sair por ela e aparecer imediatamente no extremo oposto, impedindo-o de “fugir”. Desta forma, há um limitante para o tamanho do sistema, se muito pequeno, os átomos presentes sofrerão interação com seus próprios “reflexos”, se muito grande, os átomos presentes podem nem sequer sofrer interação entre si. Utilizou-se uma simulação de RELAXAÇÃO para resolver este problema, como mostra a Figura 3 abaixo.

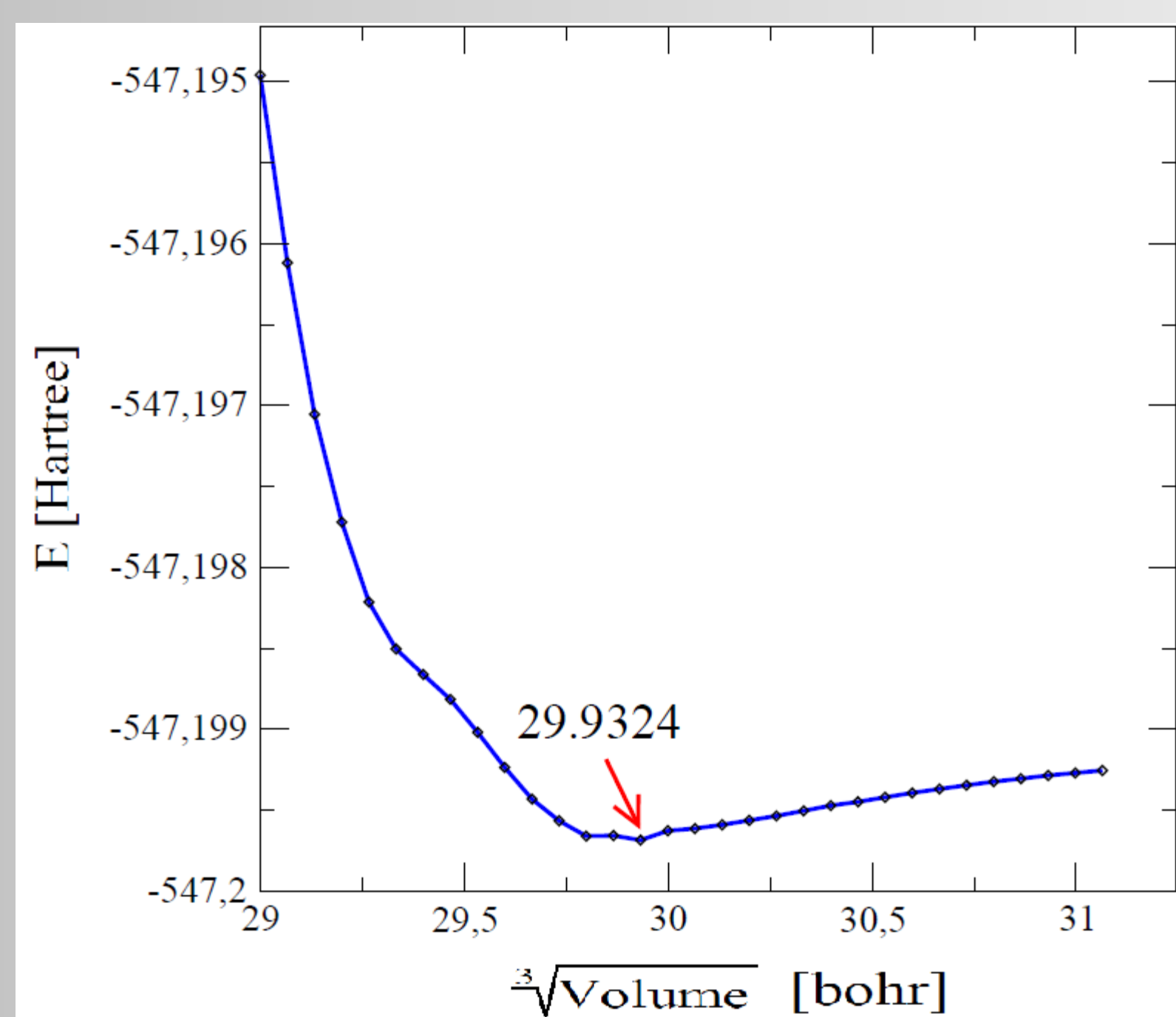


Figura 3 – Simulação de relaxação: menor energia associada ao sistema variando-se o tamanho do lado da caixa quadrada.

## RESULTADOS

Para poder ver as mudanças que ocorrem dentro da célula, é necessário entender como se comportam as moléculas e como ocorrem as ligações no interior do sistema. Foi necessário indentificar quantas ligações cada átomo possuía em vários instantes. Esta variação identificou a ocorrência de isomerização das moléculas de cubano e a polimerização destas com as moléculas de C<sub>70</sub>. Entende-se como ligação entre átomos quando se aproximam a uma distância menor que 1,4Å.

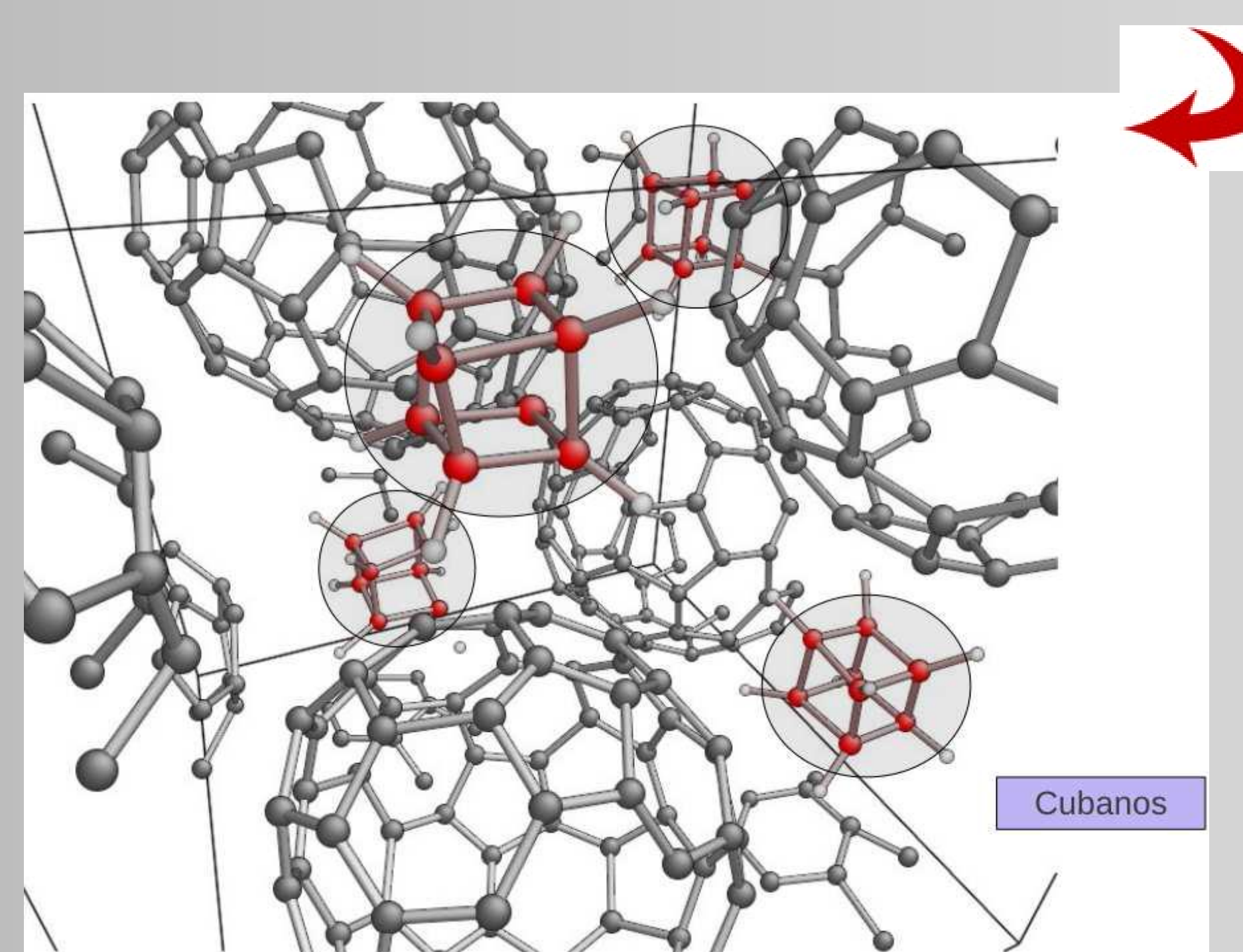
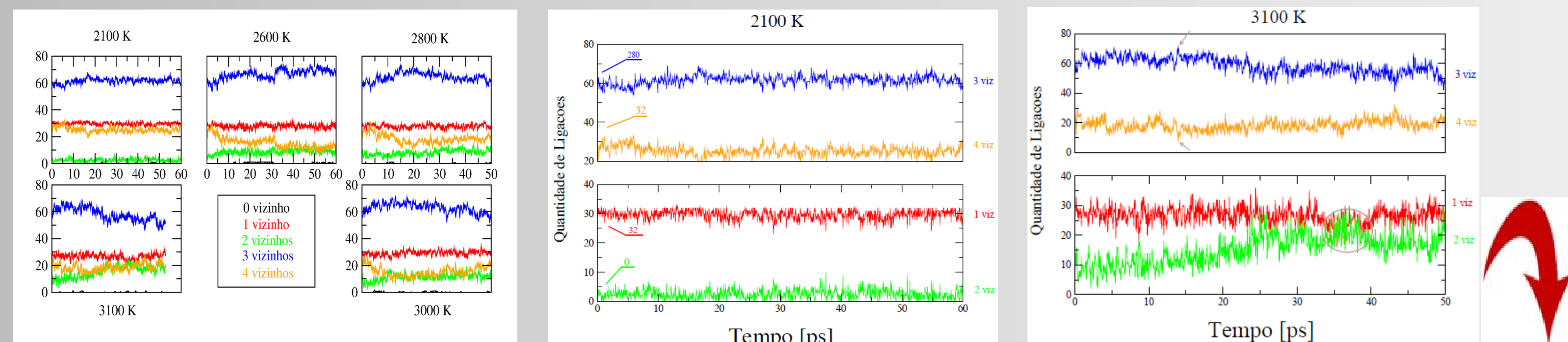


Figura 4 – Cubanos no estado inicial

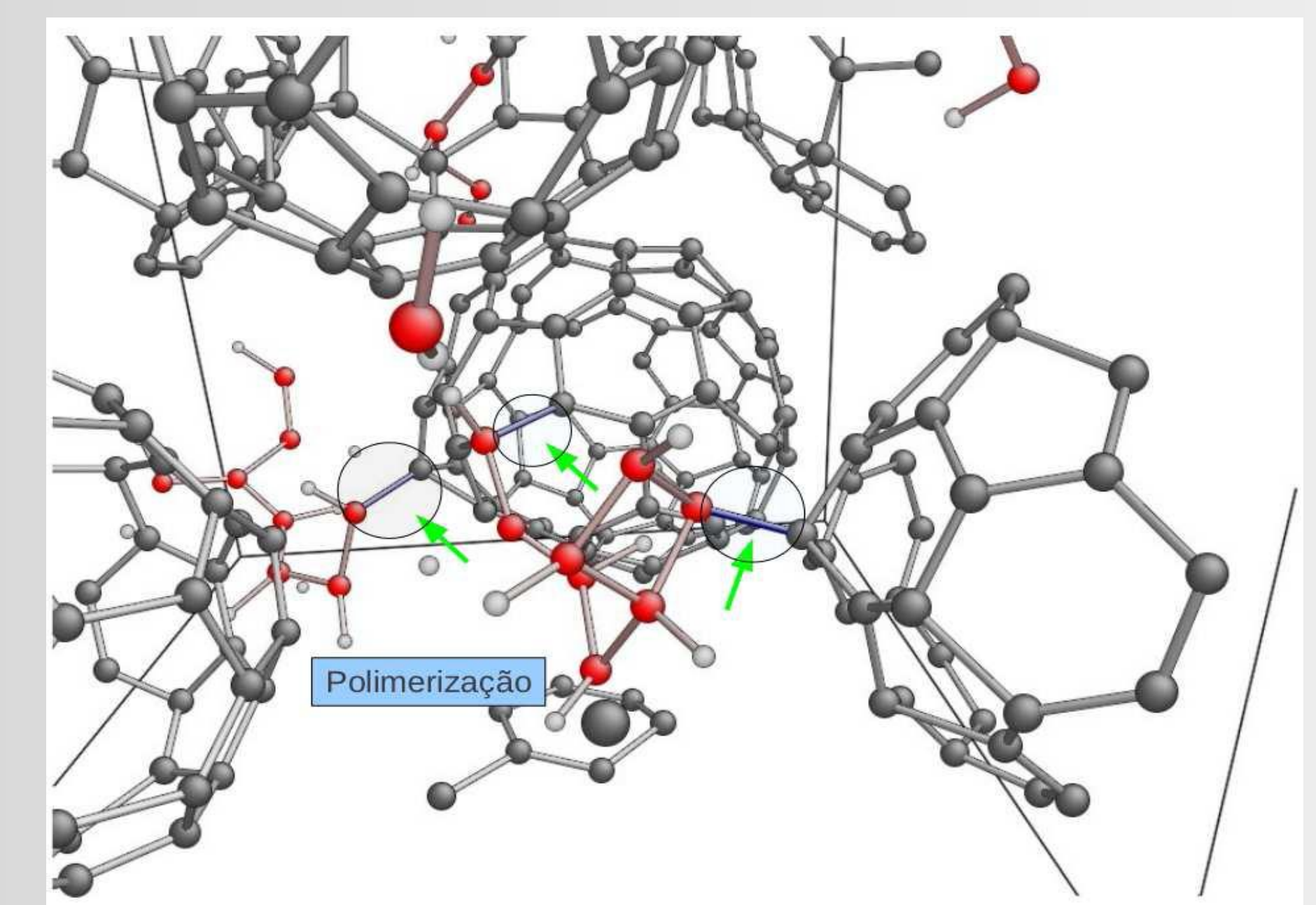


Figura 5 – Ocorrência de polimerizações entre C<sub>70</sub> e isômeros de Cubanos

## CONCLUSÕES

Com o uso de softwares gráficos, pode-se estudar o cristal de C<sub>70</sub>-Cubano e visualizar as mudanças ocorridas. Percebeu-se que, para a temperatura de 2100K, já ocorre isomerização de algumas moléculas de Cubano. Para temperaturas em torno de 2600K e 2800K, ocorre isomerização mais rapidamente e polimerizações mais significativas. À 3000K e 3100K, percebeu-se isômeros presentes desde o início e várias polimerizações ocorrendo simultaneamente, como mostra a Figura 5 acima.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro e ao orientador Prof. Dr. Vitor R. Colucci pelo suporte durante toda a vigência do projeto.

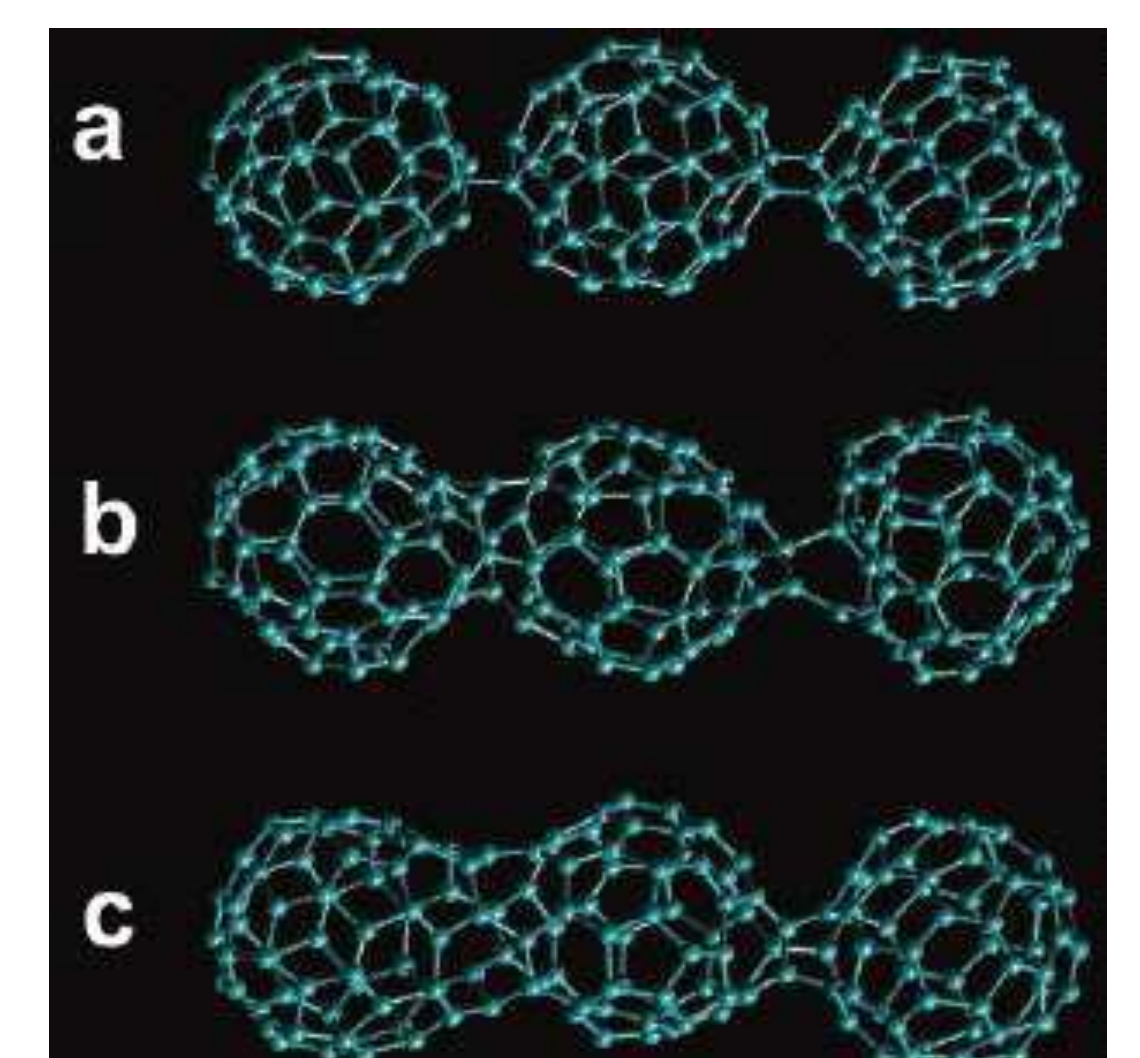


Figura 6 – Copolimerização esperada para C<sub>70</sub>